

**Секция 4.** Технология и моделирование процессов подготовки и переработки углеводородного сырья

ставляет 0,005 % мас. Наряду с этим, при работе реакторно-регенераторного блока в условиях Режим-1 содержание остаточного кокса на катализаторе выше и составляет 0,060 % мас. Увеличение содержания остаточного кокса на катализаторе снижает его активность, что оказывает

значительное влияние на селективности процесса и снижение выхода бензиновой фракции. Для увеличения массы кокса окисленного в регенераторе требуется увеличение расхода воздуха на регенерацию.

**Список литературы**

1. Bartholomew C.H. *Mechanisms of catalyst deactivation* // *Appl. Catal. A-gen.*, 2001. – Vol.212(1–2). – P.17–60.
2. Кравцов А.В. *Системный анализ и повышение*

*эффективности нефтеперерабатывающих производств методом математического моделирования: учебное пособие.* – Томск: Издательство ТПУ, 2004. – 170с.

## УЧЁТ ВЛИЯНИЯ ДЕЭМУЛЬГАТОРА ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА РАЗРУШЕНИЯ ВОДОНЕФТЯНЫХ ЭМУЛЬСИЙ

М.Е. Щетинина, К.В. Золотухина

Научный руководитель – к.т.н., доцент О.Е. Мойзес

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, mariyashetinina95@mail.ru

Развитие нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности напрямую связано с совершенствованием технологии нефтепереработки, разработкой и оптимизацией существующих процессов, обеспечивающих улучшение технико-экономических показателей и качества нефтепродуктов. Основными этапами при промысловой подготовке нефти являются процессы обезвоживания и обессоливания, которые осуществляются в результате разрушения водонефтяной эмульсии, в основном, с использованием термохимических методов [1–3].

Разные нефти обладают различными физико-химическими свойствами и поэтому подбор деэмульгатора для эффективного процесса массообмена и последующего процесса коалесценции капель воды, является актуальной задачей.

В настоящее время необходимым этапом при решении задач анализа, оптимизации и повышения эффективности действующих установок промысловой подготовки нефти (УПН) является математическое моделирование.

Поэтому целью данной работы является модернизация математической модели и программы расчета с учетом концентрации деэмульгатора, и проведение исследований влияния технологических параметров на процесс каплеобразования при промысловой подготовке нефти.

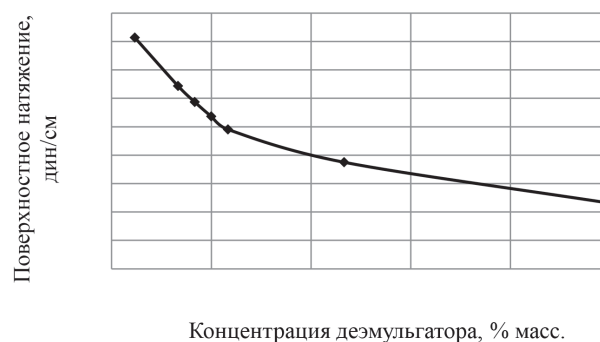
Объект исследования – водонефтяная эмульсия, которая образуется в результате добычи и

транспортировки нефти, а также реагенты-деэмульгаторы, разрушающие водонефтяную эмульсию.

Одним из основных параметров, характеризующих нефтяную эмульсию – это поверхностное натяжение. Теоретических зависимостей поверхностного натяжения от концентрации деэмульгатора практически не существует, поэтому для учета влияния концентрации деэмульгатора на процесс каплеобразования на основании опытных данных были получены теоретические зависимости влияния концентрации химического реагента на поверхностное натяжение и внедрены в математическую модель.

Расчет диаметра капель при движении водонефтяной эмульсии по трубопроводу выполнен по известной методике Тронова В.П. [1].

С применением зависимостей учета влияния химического реагента выполнены исследо-



**Рис. 1.** Зависимость поверхностного натяжения от концентрации деэмульгатора

вания влияния технологических параметров на процесс каплеобразования при разрушении водонефтяных эмульсий.

На рисунке приведена зависимость влияния концентрации химического реагента на поверхностное натяжение.

Таким образом, учет в математической мо-

дели влияния концентрации деэмульгатора на поверхностное натяжение позволит нам спрогнозировать влияние реагента на эффективность процесса каплеобразования при промышленной подготовке нефти и определить наиболее эффективные режимы процесса разрушения водонефтяной эмульсии.

### Список литературы

1. Тронов В.П. Системы нефтегазосбора и гидродинамика основных технологических процессов. – Казань: Фэн, 2002. – 512с.
2. Глаголева О.Ф., Капустина В.М. Технология переработки нефти. Часть первая. Первичная переработка нефти. – М.: Химия, 2007. – 275–287.
3. Пузин Ю.И. Практикум по химии нефти и газа. – Уфа: Изд-во УГНТУ, 2004. – 142с.

## ТЕРМОДИНАМИКА ПРОЦЕССА ЭПОКСИДИРОВАНИЯ БИОДИЗЕЛЯ

С.А. Юдаев, И.О. Долганова

Научный руководитель – д.т.н., профессор Е.Н. Ивашкина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, udgin92@mail.ru

Эпоксидные соединения – химические вещества, в состав которых входят эпоксидные кольца (одно или несколько) [1]. Эпоксидные соединения нашли широкое применение как в производстве растворителей, пластификаторов, клеев и синтетических смол. Они часто используются в различных отраслях промышленности: производство ПВХ, эпоксидных смол и лакокрасочных продуктов, а также получение конструкционных материалов с требуемыми свойствами.

Все эксперименты проводили в аппарате барботажного типа. Реакторный узел представляет собой обогреваемую воронку Шота объемом 200 мл, снизу которой подавался сжатый и осушенный воздух с расходом 2–5 мл/с. Подачу воздуха регулировали вентилем. Вверху реактора обратный холодильник конденсатор, охлаждаемый проточной водой. Снизу приемник колба на 100 мл. Температуру в реакторе 100–120 °С регулировали температурой масла, подаваемого в рубашку реактора.

На основании анализа реакционной массы оксидата, полученного в результате проведения реакции эпоксидирования, были выделены ключевые компоненты для разработки схемы превращений: метиловый эфир олеиновой кислоты (C18/1), метиловый эфир линолевой кислоты (C18/2), гидропероксид метилового эфира линолевой кислоты ГПС18/1, гидропероксид

метилового эфира линолевой кислоты ГПС18/2, альдегиды (А), надкислоты (Н), кислоты (К), эпоксиды (ЭП) и побочные продукты (ПП).

Для подтверждения термодинамической возможности протекания реакций в процессе эпоксидирования использовались квантово-химические расчеты [2]. Расчеты были проведены в программном пакете Gaussian с использованием метода теории функционала плотности (DFT) на уровне B3LYP при температуре (110 °С) и давлении (100 кПа) процесса. Этот метод был выбран в силу достаточно высокой точности по сравнению с эмпирическими методами. Уровень B3LYP является наивысшим среди уровней DFT, используемый программой Gaussian, а базисный набор выбран таким образом, чтобы сохранить управляемость расчетов, но при этом не снизить точность описания физической ситуации. Для оценки  $\Delta G$  и  $\Delta H$  брались характерные реакции по типу.

Величина  $\Delta G$ , в первую очередь, указывает в какую сторону смещено равновесие реакции. Основываясь на литературных данных, было принято допущение, что реакция является обратимой при условии  $\Delta G \leq \pm 70$  кДж/моль. Так как фактически брутто реакции окисления и эпоксидирования являются необратимыми, считаем, что для реакций 6–9 величина  $\Delta G$  обуславливает вероятность протекания. Для реакций 13–17